

# ENLACE QUÍMICO

Química 2.º Bach

Rodrigo Alcaraz de la Osa y Ángela Alcaraz de la Osa

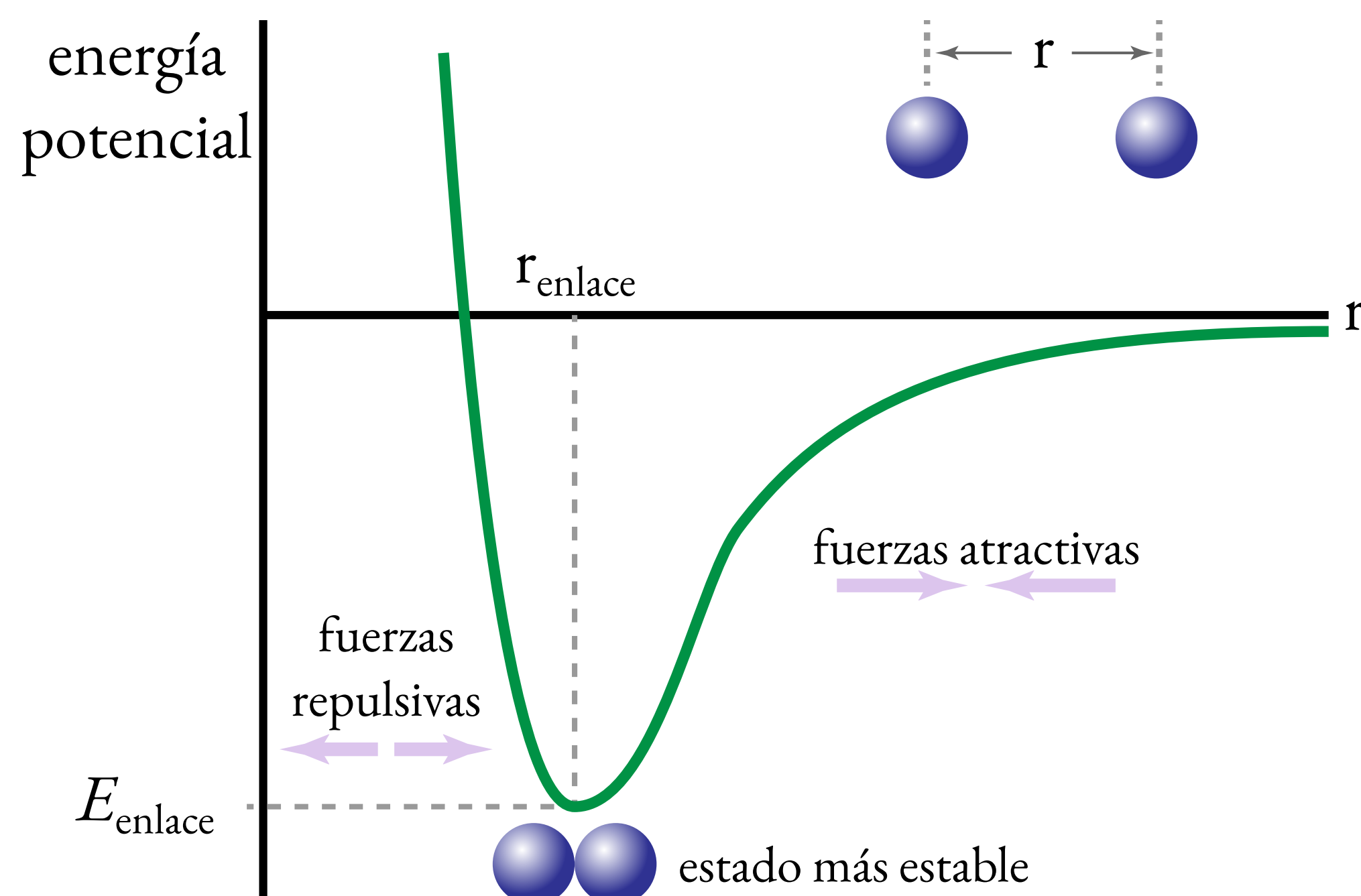


## Regla del octeto

La **configuración más estable** para cualquier átomo es contar con **ocho electrones** en la **capa exterior**.

Los elementos tenderán a **unirse** para completar su capa exterior, **intercambiando** (cediendo/captando → enlace **iónico**) o **compartiendo electrones** (enlace **covalente**), y así **ganar estabilidad**.

## Parámetros moleculares



**Potencial de Morse:** representa la energía frente a la distancia entre átomos. Según estos se van aproximando, se ponen de manifiesto fuerzas atractivas, pero si se acercan demasiado actúan fuerzas repulsivas. Traducida y adaptada de <https://ch301.cm.utexas.edu/section2.php?target=atomic/bonding/covalent-bonding.html>.

**Energía de enlace** Es la energía desprendida al formar el enlace desde la separación *infinita* hasta alcanzar la longitud de enlace. Es una medida de la FORTALEZA de un ENLACE QUÍMICO (cuanto mayor sea esta energía, más fuerte será el enlace).

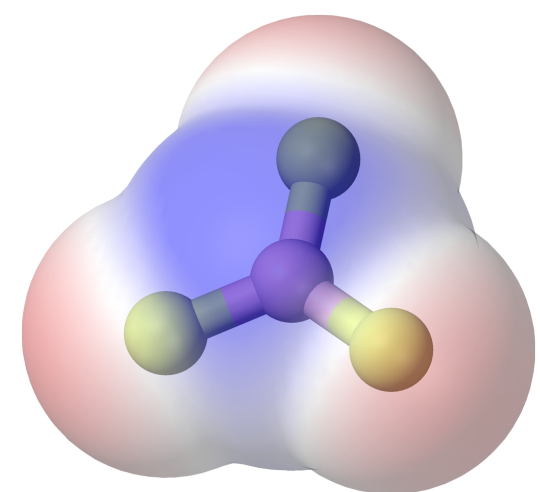
**Longitud de enlace** Distancia media entre los núcleos de dos átomos enlazados. Se trata de la distancia óptima en la que la atracción es máxima y la repulsión mínima.

**Ángulo de enlace** Ángulo formado por tres átomos enlazados consecutivamente.

**Polaridad de enlace** Es la separación de cargas eléctricas a lo largo de un enlace, dando lugar a un MOMENTO DIPOLAR ELÉCTRICO. La diferencia de electronegatividad,  $\Delta\chi$ , entre los átomos de un enlace determina su POLARIDAD:

	$\Delta\chi \lesssim 0.5$	$0.5 \lesssim \Delta\chi \lesssim 2$	$\Delta\chi \gtrsim 2$
	APOLAR	POLAR	IÓNICO
ENLACE			

Una molécula será polar si el momento dipolar total (suma vectorial) es distinto de cero.



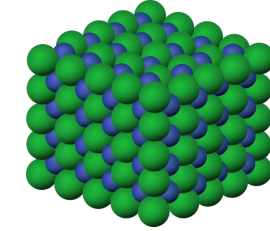
La molécula de  $\text{BF}_3$  tiene tres enlaces polares pero debido a su geometría trigonal plana el momento dipolar resultante es nulo.  
Fuente: <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Boron-trifluoride-elpot-3D-vdW.png>.

## Enlace iónico

Es un enlace que involucra la **atracción electrostática** entre **iones** de **signo opuesto**.

El **enlace iónico** suele darse **entre metales** (tienden a ceder electrones, convirtiéndose en cationes) **y no metales** (tienden a captar electrones, convirtiéndose en aniones).

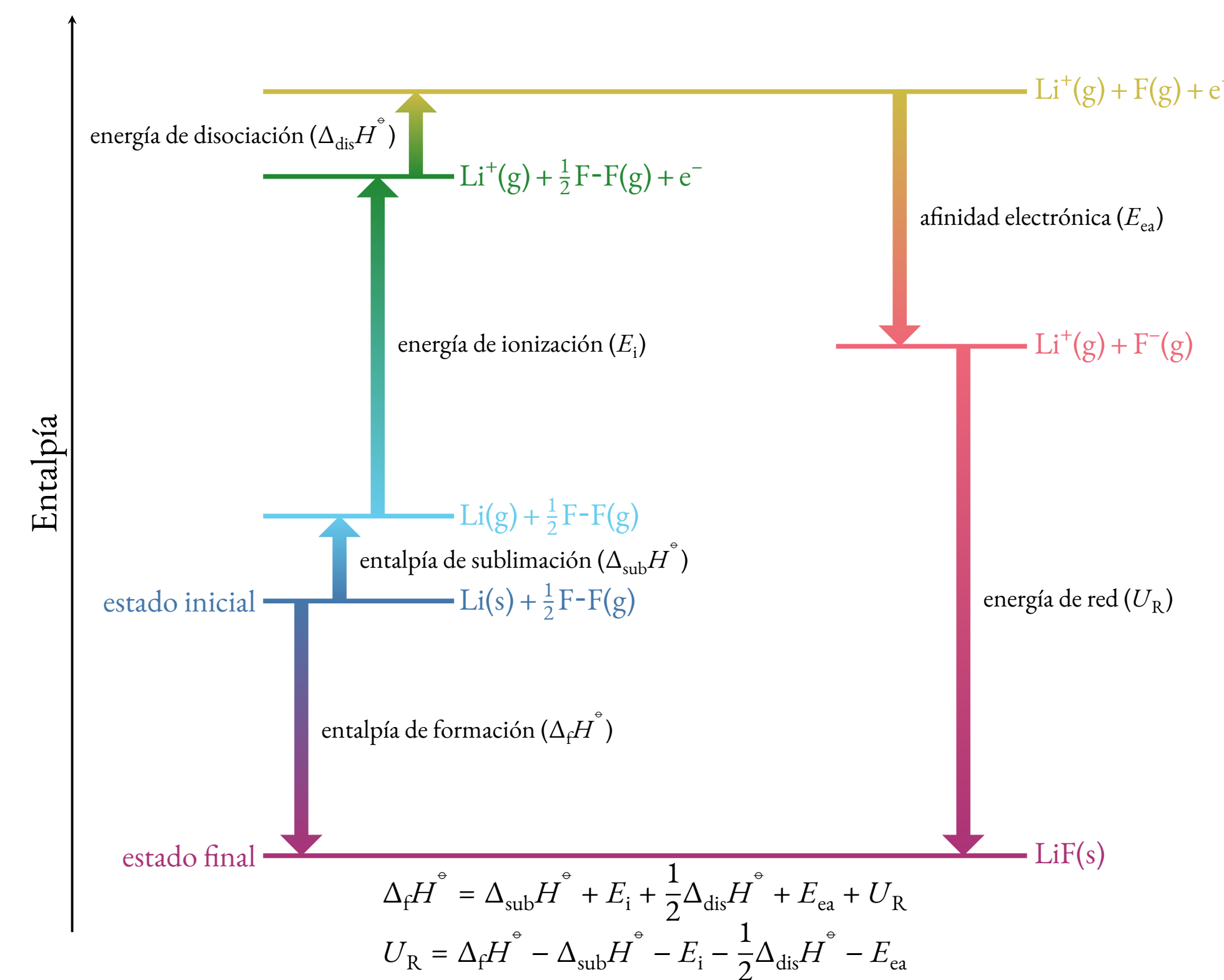
Cada ion tiende a rodearse de un número determinado de iones de signo opuesto (**número de coordinación**). Se forman así **redes cristalinas** compactas y **neutras** con diferentes geometrías según el tipo de iones que las forman.



**Energía de red o energía reticular**  $U_R$

Es la ENERGÍA LIBERADA (proceso exotérmico) al FORMAR la RED a partir de sus iones en estado gaseoso. Cuanto mayor sea su valor más estable es la red y mayor será el punto de fusión y menor su solubilidad.

*Ciclo de Born-Haber* Formación de un compuesto iónico a partir de sus elementos.



Ciclo de Born-Haber para la formación de un mol de fluoruro de litio (LiF).

Cada energía tendrá su signo según sea desprendida (< 0) o absorbida (> 0).

Basada en [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Born-haber\\_cycle\\_LiF.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Born-haber_cycle_LiF.svg).

*Ecuación de Born-Landé* Permite calcular la ENERGÍA DE RED  $U_R$ :

$$U_R = -\frac{N_A M z^+ z^- e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) \propto -\frac{z^+ z^-}{r_0},$$

donde  $N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$  es la constante de Avogadro;  $M$  es la constante de Madelung, relacionada con la geometría del cristal;  $z^+$  y  $z^-$  son los números de carga del catión y del anión, respectivamente;  $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$  es la carga elemental,  $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2}$  es la permitividad eléctrica del vacío;  $r_0$  es la distancia al ion más cercano; y  $5 < n < 12$  es el exponente de Born (experimental).

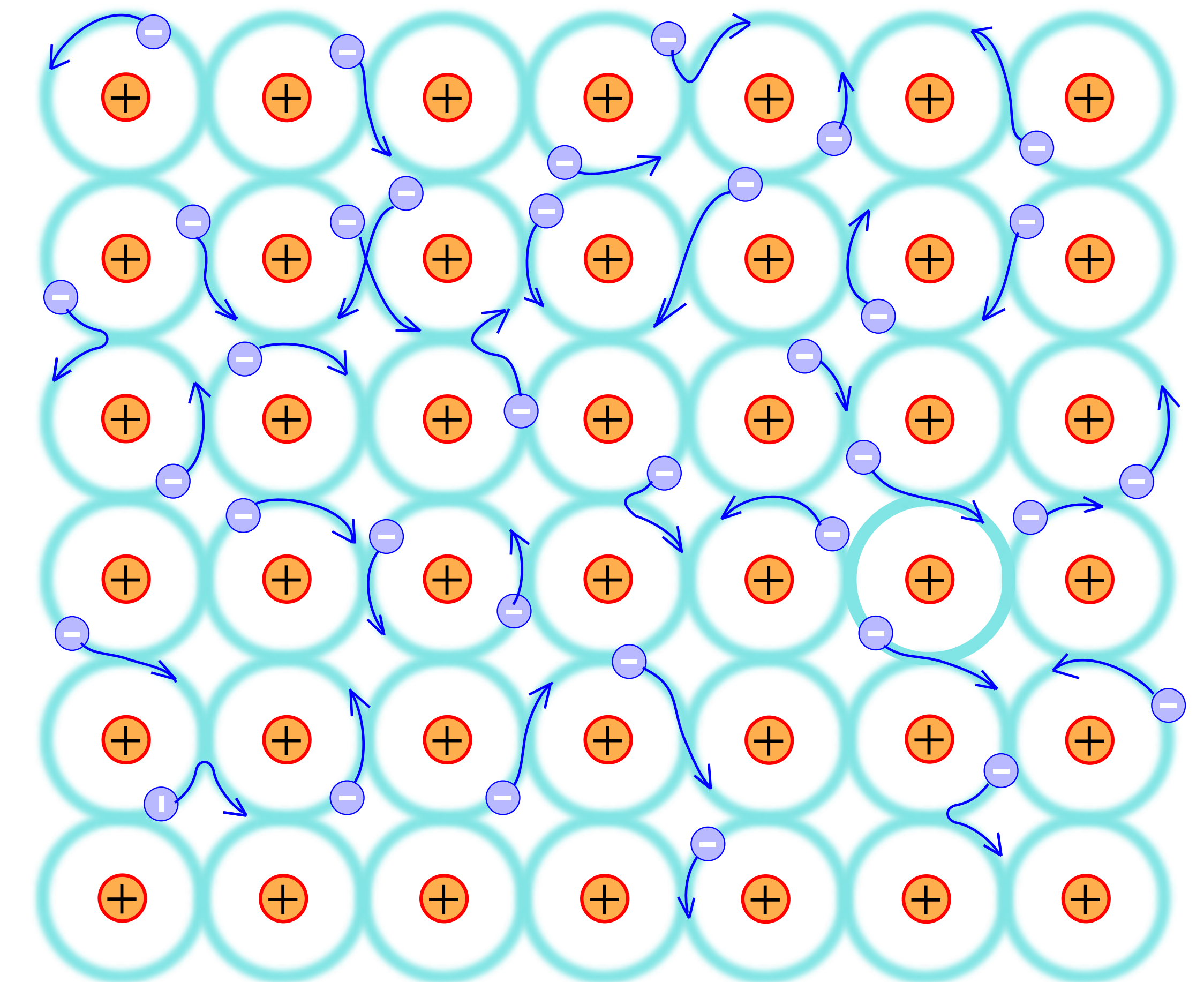
## Propiedades de las sustancias iónicas

- Debido a las **intensas fuerzas electrostáticas** entre los iones, suelen tener **temperaturas de fusión y ebullición muy elevadas**, por lo que la mayoría son **sólidos cristalinos a temperatura ambiente**.
- Ante **golpes**, el **alineamiento** de los **iones** positivos y negativos **puede perderse**, por lo que son muy **frágiles**, aunque también muy **duros**.
- Son **solubles en disolventes polares** (serán más solubles cuanto menor sea  $U_R$ ).
- Fundidos** o en **disolución, conducen la corriente eléctrica**.

## Enlace metálico

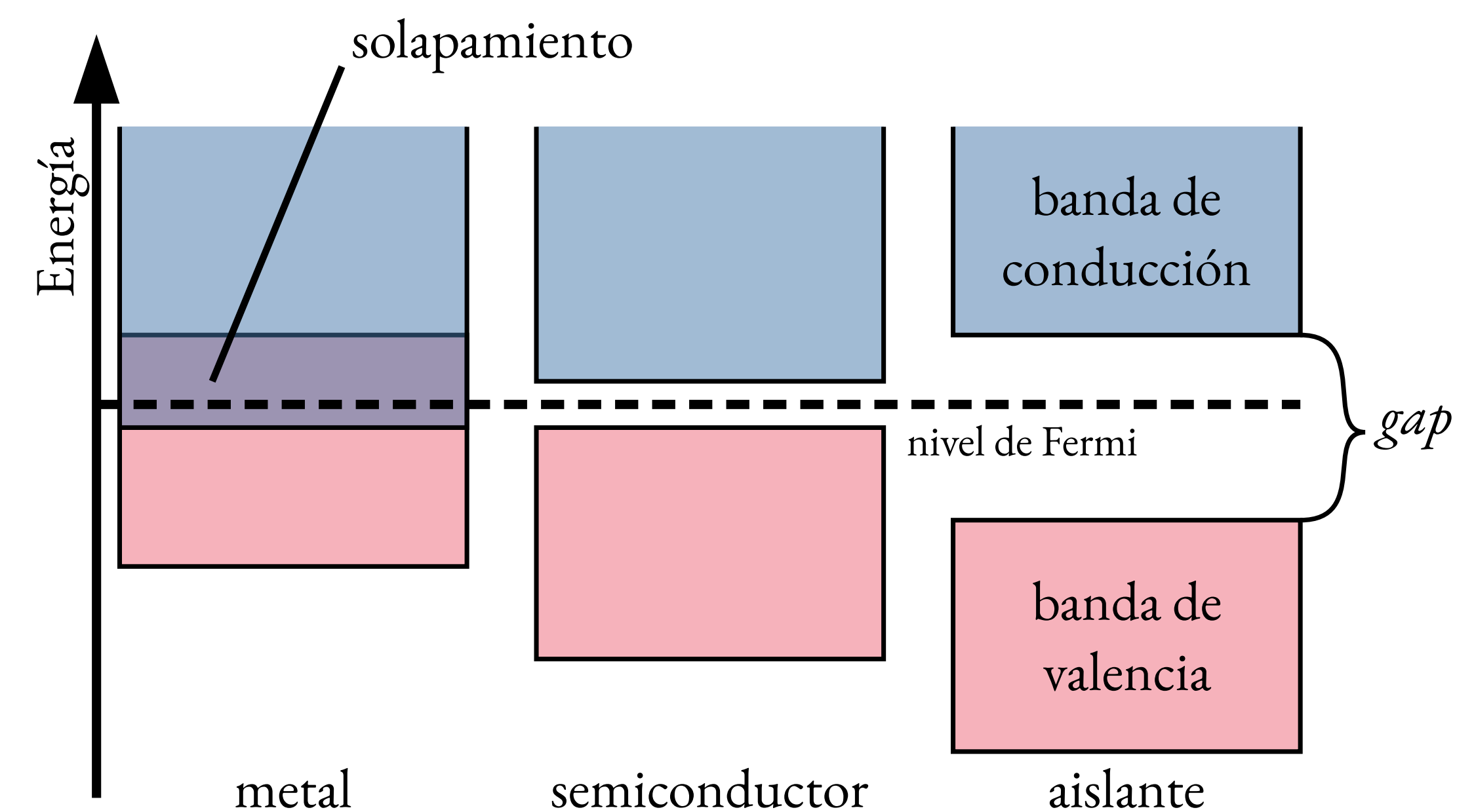
El **enlace metálico** es el enlace químico que **mantiene unidos** a los **átomos** de un **metal** entre sí. Surge de la **atracción electrostática** entre los **electrones** de conducción y los **cationes** metálicos.

## Modelo del gas electrónico



Modelo del **gas electrónico**, con los **cationes** en **posiciones fijas** y los **electrones moviéndose libremente** en una **nube**. Fuente: [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Metallic\\_bond\\_model.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Metallic_bond_model.svg).

## Teoría de bandas



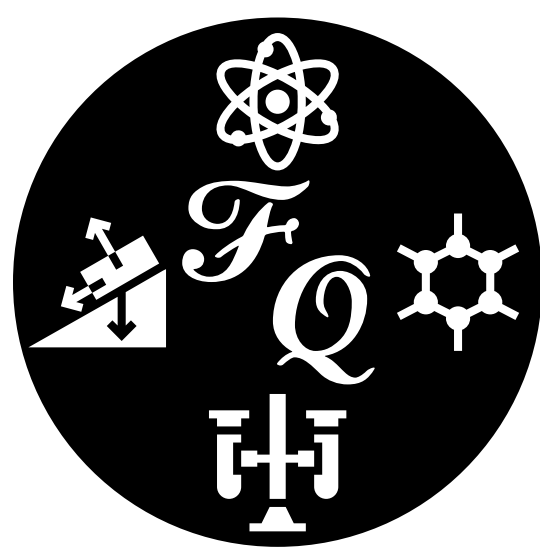
Comparación de la **estructura de bandas** electrónicas de un **metal**, un **semiconductor** y un **aislante**.

Traducida y adaptada de <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Isolator-metal.svg>.

## Propiedades de las sustancias metálicas

- Apariencia brillante**.
- Son **buenos conductores** del **calor** y de la **electricidad**.
- Forman **aleaciones** con otros metales.
- Tienden a ceder** (perder) **electrones** al reaccionar con otras sustancias.
- La mayoría son **sólidos** a temperatura ambiente (**Hg** es





# ENLACE QUÍMICO

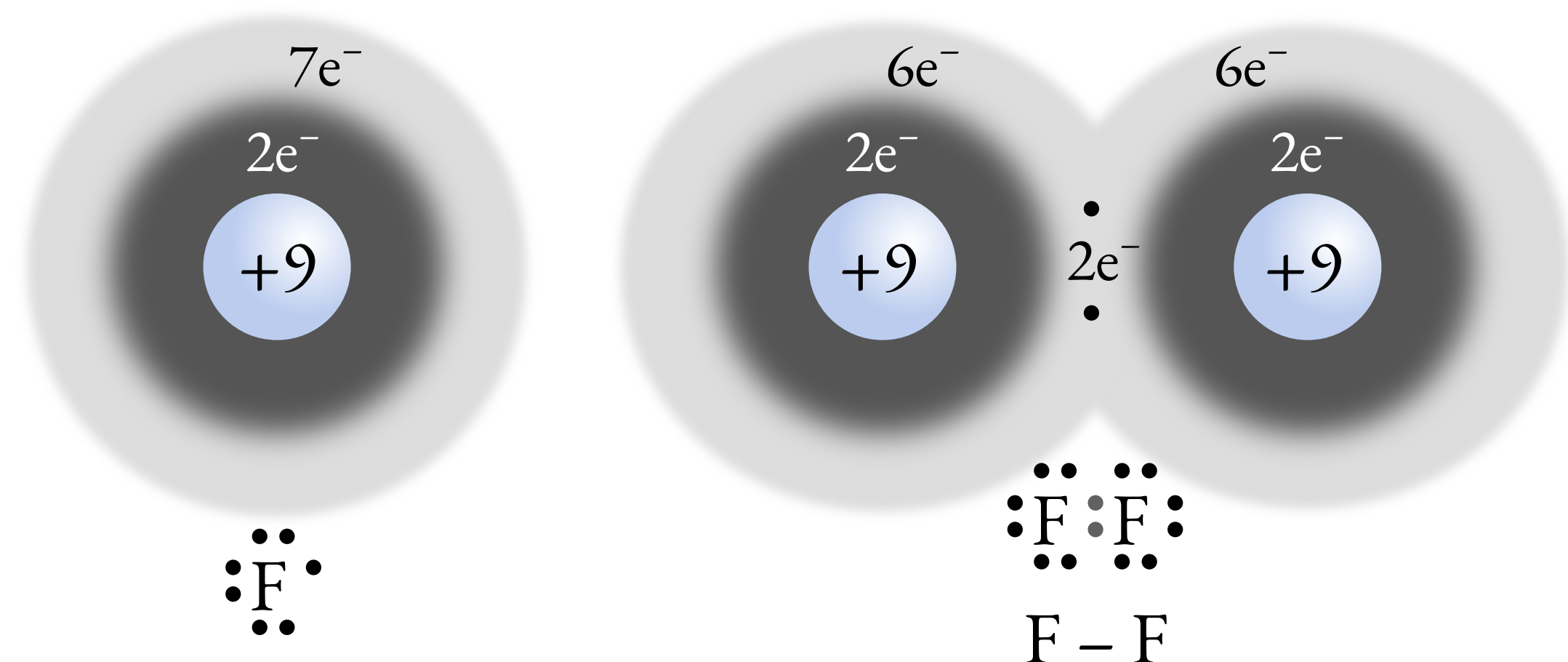
Química 2.º Bach

Rodrigo Alcaraz de la Osa y Ángela Alcaraz de la Osa



## Enlace covalente

Es un enlace químico que implica la **compartición** de **pares** de **electrones** entre átomos. El **enlace covalente** suele darse **entre no metales** (tendencia a captar electrones).

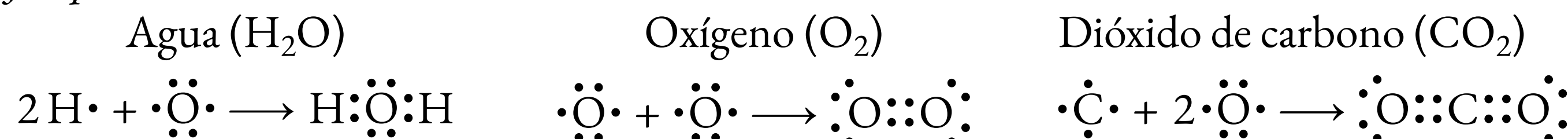


Representación de la **unión covalente** entre dos átomos de **flúor** (F) para formar F<sub>2</sub>, con un par de electrones compartidos. Adaptada de [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Covalent\\_bond\\_fluorine.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Covalent_bond_fluorine.svg).

### Estructuras de Lewis

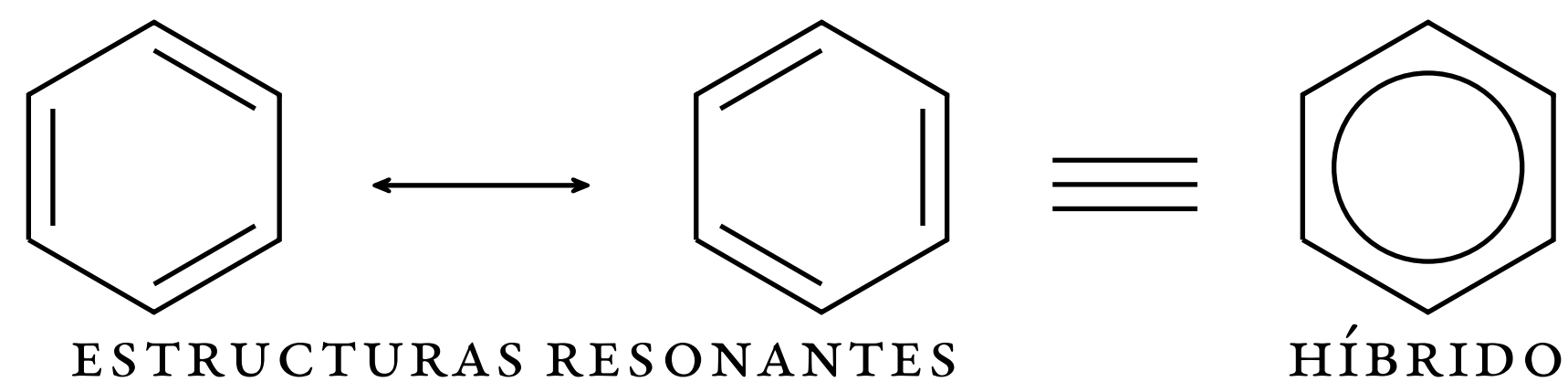
Se trata de **diagramas** que **muestran** la **unión** entre los **átomos** de una **molécula** y los **pares solitarios** de **electrones** que pueden existir en la molécula.

#### Ejemplos



### Resonancia

La **RESONANCIA** es una forma de describir el enlace en ciertas moléculas mediante la combinación de varias **ESTRUCTURAS RESONANTES** cuyo conjunto se conoce como un **HÍBRIDO** de **RESONANCIA**. Es especialmente útil para describir los **ELECTRONES DESLOCALIZADOS** (enlaces = en distintas posiciones) en ciertas moléculas o iones poliatómicos.

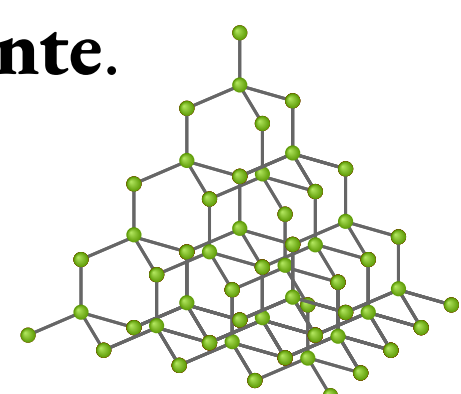
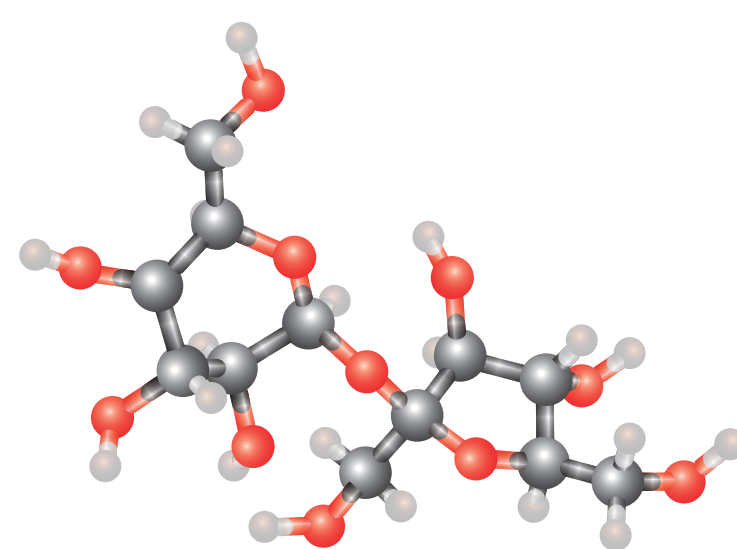


### Propiedades de las sustancias covalentes moleculares

- Debido a las **débiles interacciones entre moléculas** covalentes, suelen tener **temperaturas de fusión y ebullición bajas** (muchos compuestos covalentes son **líquidos** o **gases** a **temperatura ambiente**).
- Son **solubles** en **disolventes polares y apolares**.
- En estado **sólido** son compuestos **blandos** y **frágiles**.
- Son **malos conductores** del **calor** y de la **electricidad**.

### Propiedades de las sustancias covalentes cristalinas

- Debido a los **fuertes enlaces covalentes** entre los átomos, suelen tener **temperaturas de fusión y ebullición altas**, por lo que son **sólidos** a **temperatura ambiente**.
- Son sustancias muy **duras** aunque **frágiles**.
- Son **insolubles**.
- Suelen ser **malos conductores** (no así el grafito o el grafeno).



## Geometría molecular

### TRPECV

La **TEORÍA DE REPULSIÓN DE PARES DE ELECTRONES DE LA CAPA DE VALENCIA** (TRPECV) se basa en que, como los electrones de valencia se repelen unos a otros, estos tienden a adoptar una disposición espacial que minimiza dicha repulsión.

DENSIDADES ELECTRÓNICAS	NÚMERO DE PARES SOLITARIOS (EN AMARILLO)			
	0	1	2	3
2	Lineal, 180°			
3	Trigonal plana, 120°	Angular, < 120°		
4	Tetraédrica, 109.5°	Piramidal trigonal, < 109.5°	Angular, < 109.5°	Lineal, 180°
5	Bipiramidal trigonal	Balancín	Forma de T	Lineal, 180°
6	Octaédrica	Piramidal cuadrada	Cuadrada plana	

Partiendo de las estructuras de Lewis, se determinan las **DENSIDADES ELECTRÓNICAS** o direcciones de enlace, teniendo en cuenta que, para ver la repulsión, tanto los enlaces sencillos, dobles y triples así como los pares solitarios afectan como una única densidad electrónica (dirección de enlace).

### TEV/Hibridación

Según la **TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA** (TEV) un enlace covalente se forma cuando dos orbitales con electrones desapareados se solapan y comparten un par electrónico.

SOLAPAMIENTO	ENLACE	ORBITALES		
Frontal (orbitales enfrentados)	$\sigma$ (sencillo)	s + s	s + p	p + p
Lateral (orbitales paralelos)	$\pi$ (múltiple)		p + p	

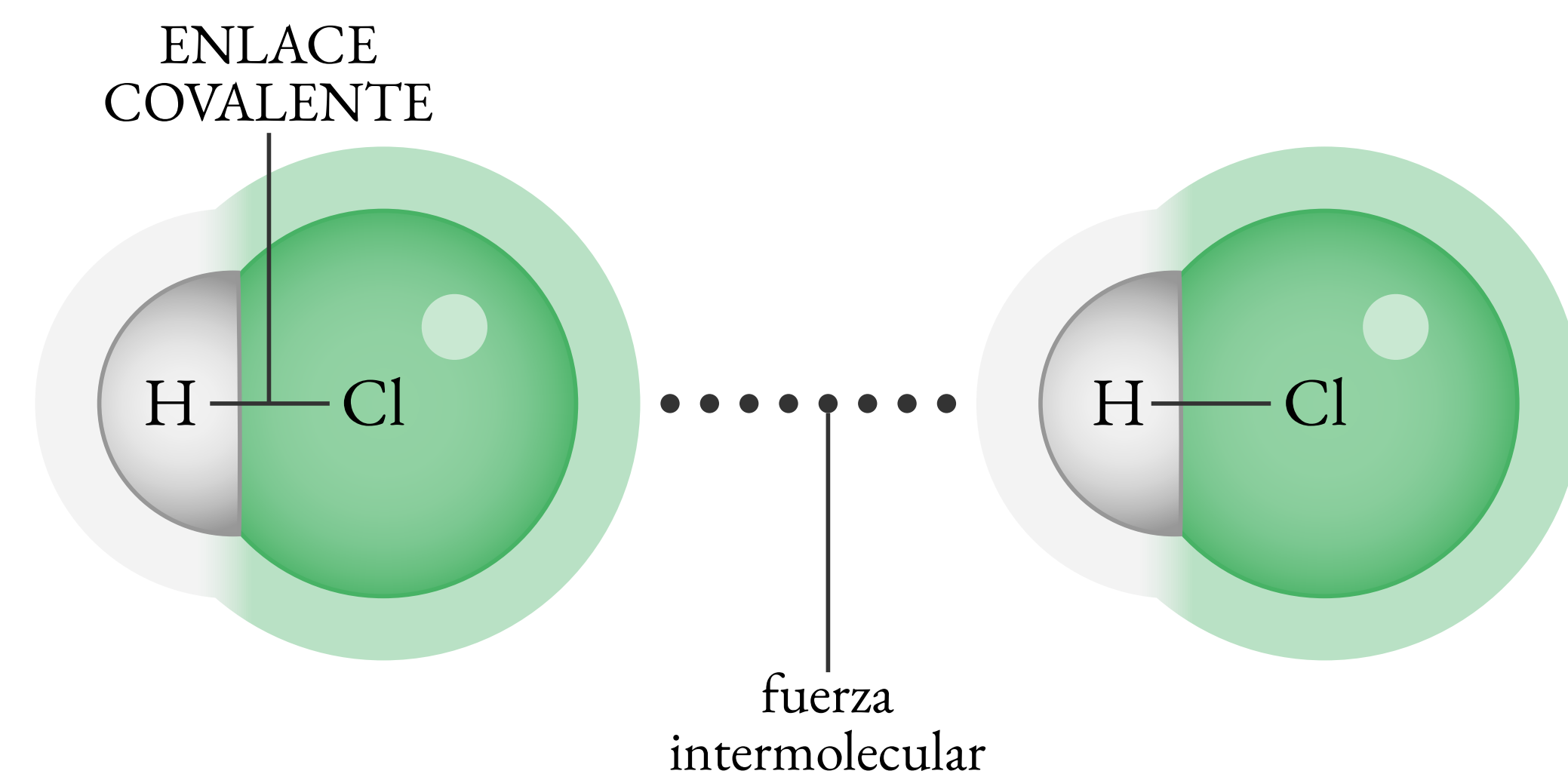
La **HIBRIDACIÓN** consiste en combinar orbitales atómicos del átomo central para formar **ORBITALES HÍBRIDOS** energéticamente iguales y orientados en la dirección del enlace.

	HIBRIDACIÓN sp	HIBRIDACIÓN sp <sup>2</sup>	HIBRIDACIÓN sp <sup>3</sup>
ORBITALES ATÓMICOS	s + p (2)	s + p + p (3)	s + p + p + p (4)
ORBITALES HÍBRIDOS	180°	120°	109,5°
GEOMETRÍA (EJEMPLO)	Lineal (BeCl <sub>2</sub> )	Trigonal plana (BF <sub>3</sub> )	Tetraédrica (CH <sub>4</sub> )

## Fuerzas intermoleculares

Las **fuerzas intermoleculares** son las **fuerzas** que existen **entre** las **moléculas**, incluyendo las fuerzas de atracción o repulsión que actúan entre las moléculas y otros tipos de partículas vecinas, por ejemplo, átomos o iones. Las fuerzas intermoleculares son **débiles en relación con** las **fuerzas intramoleculares** (las que mantienen unida una molécula). Son además **responsables** del **estado de agregación**, ya que su fortaleza está relacionada con las temperaturas de fusión y ebullición de la sustancia.

### Fuerzas de van der Waals



**Atracción intermolecular** entre moléculas de **cloruro de hidrógeno**, HCl. Traducida y adaptada de <https://www.coursehero.com/sg/organic-chemistry/intermolecular-forces/>.

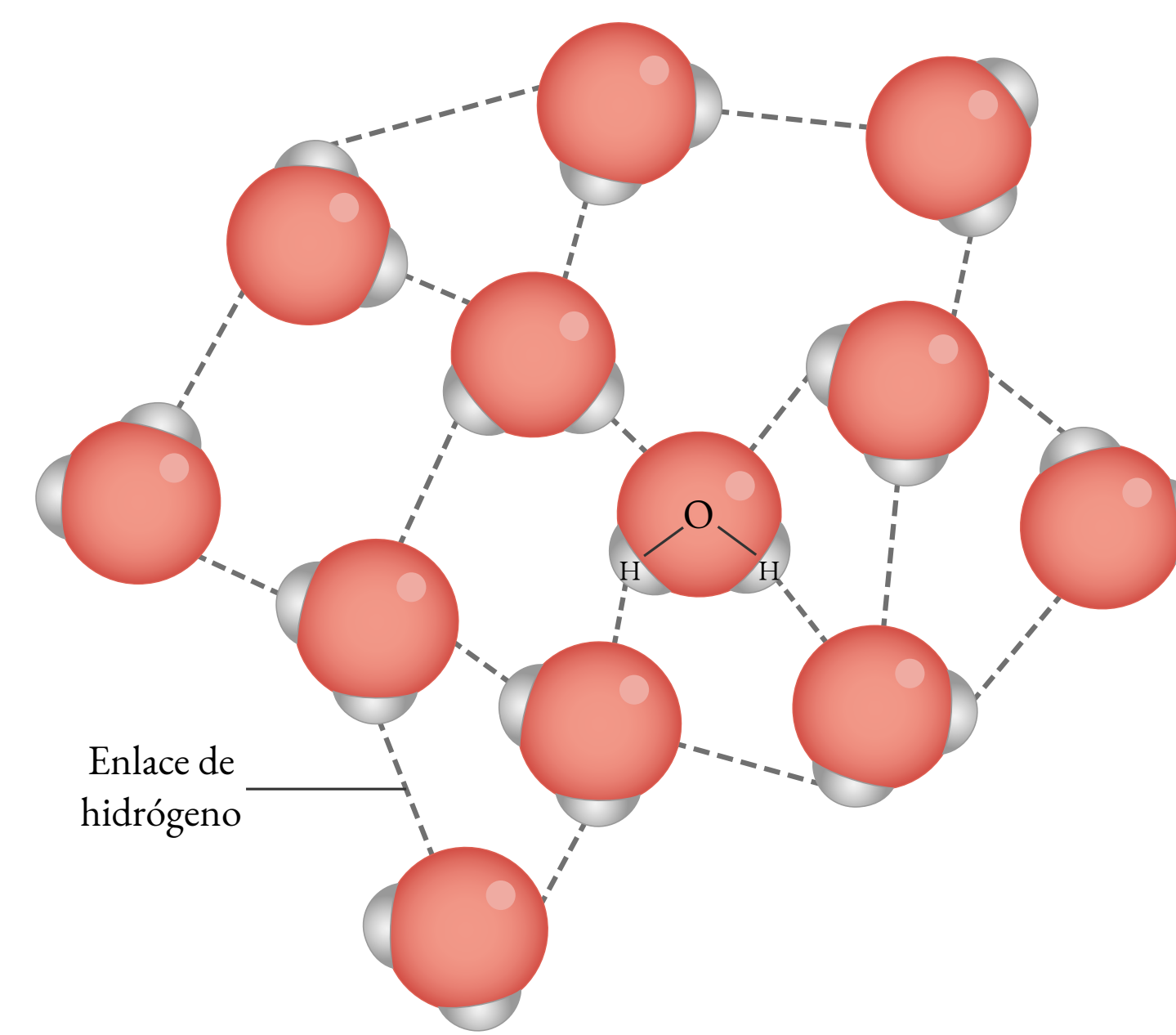
Se pueden dar entre **moléculas polares** (dipolo-dipolo, más fuertes cuanto mayor sea la polaridad de la molécula), y **apolares** (llamadas **fuerzas de dispersión de London**, más fuertes cuanto más grandes y masivas son las moléculas involucradas).

### Enlaces de hidrógeno

Son las **fuerzas** intermoleculares más **intensas**. Se dan entre moléculas que contienen átomos de **hidrógeno** unidos a átomos de **nitrógeno** (N), **oxígeno** (O) o **flúor** (F).

Los **enlaces de hidrógeno** son **responsables** de:

- Que el **agua** (H<sub>2</sub>O) tenga una **temperatura de ebullición anormalmente alta** (100 °C a presión atmosférica).
- La **estructura** de **proteínas** y **ácidos nucleicos**, como la **doble hélice** del **ADN**.
- La **estructura** de **polímeros**.



**Enlaces de hidrógeno** entre átomos de H y O en moléculas de **agua** (H<sub>2</sub>O). Traducida y adaptada de <https://www.coursehero.com/sg/organic-chemistry/intermolecular-forces/>.

crystal covalent (graphite) > 3600 °C	>	solid metallic (Ti) 1668 °C	>	crystal ionic (NaCl) 801 °C	>	H bonds of H (H <sub>2</sub> O) 0 °C	>	dipole- dipole (CO) -205 °C	>	London (Ne) -248.4 °C
← Mayor fortaleza, temperaturas de fusión y ebullición más elevadas										